

VÁLASZ GYÖRGYI GÉZÁNAK

VÁN PÉTER: NEMEGYENSÚLYI TERMOMECHANIKA C. MTA DOKTORI
ÉRTEKEZÉSÉNEK BÍRÁLATÁHOZ

Köszönöm az alapos elemzést és bírálatot. Nagyon sok észrevétellel egyetérték, ezeket nem fogom kommentálni.

A bírálat első és fő részével kapcsolatban a megjegyzéseimet pontokba szedtem:

- *Reológia*. Ez a rész valóban vázlatos, azért, mert ide tartozó munkáim nagy része erősen műszaki jellegű. A hiányzó magyarázat oka az, hogy a közetmechanikai kísérletek alapján nem figyelhető meg onsageri értelemben vett reciprocitás, sem szimmetrikus, sem antiszimmetrikus. Kereszteffektus van, de nem mutat ilyen tulajdonságokat. Mivel ezek a szimmetriatulajdonságok a mikroszkopikus modell elemi szimmetriáiból következnének, ez úgy magyarázható, hogy nincs egyértelmű és egyszerű mikroszkopikus mechanizmus a fenomenologikus modell mögött. Az anyag komplex, egyszerre repedezik, szemcsés, szilárd fázisok változnak benne, de a termodinamikai elmélet univerzális, a belső változó csak a lokális egyensúlytól való eltérést jellemzi ezért érvényes. Speciális esetekben, nagyon homogén és rideg köveknél például a mikrorepedéseloszlás második momentuma, az úgynevezett "fabric tensor", lehetne konkrétan egy mezoszkopikus értelmezés, de annak dinamikája nem reológia, nem homogén, nagyon könnyen lokalizálódik.
- *Eckart vagy Landau*. Az elsőrendű disszipatív relativisztikus folyadékoknak van Eckart-elmélete, amely a lokális egyensúlyt a nemrelativisztikus analógiájára definiálja. Viszont az áramlás rögzítése lehet Eckart-féle és Landau-Lifschic-féle, attól függően, hogy a sebességmezőt a részecskeáramhoz, vagy az energiaáramhoz rögzítjük. Tehát itt két különböző dologról van szó, a Landau és Lifschic Elméleti fizika sorozatának Hidrodinamika kötetében Eckart-elmélet van, csak nem nevezik el.
- *Fő gyengeség: relativisztikus nyomás*. Itt a termosztatikus nyomás és a dinamikai feszültség, illetve nyomás viszonyáról van szó. A termosztatikai p az entrópia térfogat szerinti deriváltja, szorozva a hőmérséklettel a dinamikai P^{ab} az energiaimpulzus-tenzor adott sebességmező szerinti tér-térszerű komponense. Az előbbi Lorentz-skalár, az utóbbi pedig másodrendű tenzorként transzformálódik. A két dolog nincs ellentmondásban, a termodinamikai elmélet beilleszti a termosztatikai nyomást az impulzusmérlegbe. A viszkózus nyomás pontosan a kettő különbsége [1]:

$$\Pi^{ab} = P^{ab} + p\Delta^{ab}. \quad (1)$$

Itt $\Delta^{ab} = \delta^{ab} - u^a u^b$ pedig az u^a négyessebességre merőleges vetítés, a, b a négydimenziós Minkowski téridő vektorainak absztrakt indexei, illetve $u^a u_a = 1$. Disszipációmentes esetben, Euler-folyadékra $P^{ab} = -p\Delta^{ab}$, és p a nyomástenzor sajátértékének mínusz egyszerese, amely ez alapján is

Date: 2019. október 11..

Lorentz-skalár. Ezeket az összefüggéseket a függelékben nem mutatom meg. Talán még egyszerűbben látszik ugyanez a megfelelő Galilei-relativisztikus formulán, lásd [2]-ben, (60) egyenlőtlenség, utolsó tag: a dinamikai nyomás transzformálódik, de a termostatikai nem.

- *Fő gyengeség: tudománytörténet általában.* Itt nem mindig egyszerű a helyzet. Van amikor átlépünk problémákon, azt gondolva, hogy lényegtelenek és megoldottak és később kiderül, hogy mégsem. A termodinamikában, és értekezésemben is, többször találkozhatunk régi kérdésekkel. A relativisztikus hőmérséklet, "gyors hőmérők" hiányában, inkább lényegtelen mint megoldott dolognak számít, illetve számított. Egy másik, az értekezésben szereplő hasonló probléma az anyagi objektivitás elvének megfogalmazása a kontinuumelméletben. Ez bírálóm kisebb megjegyzései között többször is felbukkan (kisebb megjegyzések: 17.o., 29.o. 6s, 53-54.o., 111.o.). Ez egy megoldottnak és lényegesnek tekintett kérdés. Az értekezésben rámutatok, hogy az általánosan elfogadott Noll-féle definíció, [3, 4, 5], rossz, vagy legalábbis nem teljes, ahogy az egy Galilei relativisztikusan is négydimenziós megfogalmazásból világosan látszik: a (2.6)/2 formula helyett a (2.7) a helyes. Mindkét esetben azért tettem függelékbe a fő érveimet, a relativisztikus hőmérséklet történeti és az áramlásos időderiváltak matematikai elemzését, mert egy fizikai elemzésből kilógnak és önmagukban nem elég súlyos érvek. Mindezzel együtt a megjegyzést köszönöm és további publikációkban figyelembe veszem.

1. VÁLASZOK BÍRÁLÓM SZÁMOZOTT KÉRDÉSEIRE:

1. *Viszony a Hamilton mechanikához.* Remélem általánosabban is érvényes, dolgozunk rajta.
A disszipatív folyamatok fejlődési egyenleteinek származtatására a fizika általában a disszipációmentes esetben bevált technikáit használja, elsősorban különféle variációs elveket. Ez arra vezet, hogy a módszerek megkettőződnek, másképp járunk el a nem disszipatív és a disszipatív esetben, a két eljárást össze kell illeszteni. Ezt csinálják a fázismező elméletek, vagy a szisztematikusabb GENERIC (General Equation for Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling) elmélet is. A nemegyensúlyi termodinamika legújabb eredményei szerint, például duális belső változók esetén, önmagában második főtétele elegendő lehet. A nemdisszipatív határesetben szimplektikus, Hamiltoni struktúra, illetve Euler-Lagrange formájú fejlődési egyenletek adódnak a levezetések végén. A szimmetriák szerepe vagy a mérlegek eredete kérdéses, ez utóbbiakat leginkább kényszerként használjuk. Hogy meddig juthatunk ezzel módszerrel, és miféle új fizikára vezethet, ezt most kezdi felderíteni a nemegyensúlyi termodinamikai közösség. Ilyen problémákon dolgozó szerzőket hívtam meg nemrég a Philosophical Transactions of Royal Society szerkesztésemmel jelenleg összeálló tematikus különszámába, amelynek címe "Fundamental Aspects of Nonequilibrium Thermodynamics". Kovács Róberttel közös hozzájárulásunk kéziratát a különszámhoz már hozzáférhető, [6], és erre a kérdésre fókuszál.
2. *Viszkózitási tenzor szimmetriája.* Csak szimmetrikus L^{ijkl} esetén van disszipációs potenciál. Az anyagi szimmetriák tovább csökkentik az együtthatók számát, teljesen hasonlóan, mint a negyedrendű rugalmassági tenzor esetén.

Az anizotrop folyadékok ritkábbak, mint az anizotrop rugalmas anyagok. De például folyadékkristályok esetén elvileg a viszkozitási tenzornak több komponense van, mint az izotróp anyagokban lehetséges három. Ez nem függ attól, hogy állandók-e az együtthatók vagy nem. Ennek megmérése nem egyszerű, mert áramlás közben az anizotrópia lokális, helyről helyre változhat.

3. *Hidrodinamikai kép kiterjesztése.* Igen, több ilyen eredmény is létezik, de nem termodinamikai levezetéssel és nem disszipatív esetre.

Általában pont fordított az eljárás, a kvantummechanikai egyenletet tekintjük adottnak és abból kapjuk a hidrodinamikai formát. Mágneses tér jelenléte esetén a sebességmező rotációja a vektorpotenciállal arányos, [7]. Több részecske esetén a hidrodinamikai leírás elvileg szintén lehetséges, de módosítani kell a szokásos többkomponensű folyadékelméletet, kezelni kell a részecskék függetlenségét (de nem egészen úgy, ahogy Jánossy Lajos csinálta [8]). A Dirac-egyenlet hidrodinamikai leírását T. Takabayasi [9], a kvantumszindinamika átfogalmazását Roman Jackiw és munkatársai adták meg [10, 11]. A Klein–Gordon-egyenlet hidrodinamikai formájának az általános relativitáselméletbe illesztésével Biró Tamással foglalkoztunk [12]. Amit kapunk az nem a gravitáció kvantálása, hanem a kvantummechanika geometrizálása, az Einstein-egyenlet kozmológiai tagjában megjelenik a relativisztikus Bohm-potenciál. A dolgozatban ismertetett fordított gondolatmenet egy eredeti, termodinamikai kvantálási eljárást jelent.

4. *Kvadratikus forma.* Itt nem csak a Taylor sorfejtésről van szó, hanem a Morse lemma is használható az átskálázási szabadság miatt.

A dolgozatban levezetett kvadratikus potenciálon alapuló, Kluitenberg–Verhás-test speciális esetekben tartalmazza a Newton, Kelvin–Voigt, a Maxwell, a Zener–Poynting–Thomson reológiai testmodelleket, illetve ezek bizonyos további változatait az objektív derivált természetétől függően. Folyadékok esetén számos további ismert reológiai testet kapunk, illetve izotróp esetben a térfogati- és deviatorikus testek is megjelennek. Az entrópiát a belső változó szerint Taylor-sorfejtve az első el nem tűnő tag négyzetes, amennyiben a belső változó értéke nulla lokális egyensúlyban. Ezt reológia esetén feltételezzük. Ha nem tudjuk a fizikai jelentést, akkor átskálázhatjuk úgy, hogy a kvadratikus tagok együtthatói eltűnnek. Ez a katasztrófaelméletből ismert, a skalár értékű függvények stacionárius pontjainak osztályozását megadó Morse-lemma speciális esete. Termodinamikai szerepét Verhás József ismerte és használta fel a dinamikai szabadsági fokok elméletében [13, 14]. A szokásos mérésekben nem is választhatóak szét az esetleges sztatikus és a transzportegyütthatók.

5. *Szimmetriák szerepe.* Igen, ez a kérdés hagyományosan nem része a nem-egyensúlyi termodinamikának.

Az alapvető fizikai mennyiségek mérlegeit, beleértve azok definícióját is, a nemegyensúlyi termodinamika általában adottnak tekinti, például a mérlegeket kényszerként alkalmazza. Lehetséges téridő szimmetriák alapján következtetéseket levonni Lagrange-formalizmus nélkül is, a nemrelativisztikus kontinuummechanikában például a virtuális teljesítmény invarianciájára is épülnek bizonyos mérlegeket származtató gondolatmenetek [15].

6. *Termodinamika korrelált rendszerekben.* Valószínűleg nincsenek, mert a gondolatmenet a szokásos logaritmikus entrópián alapul.

Ismereteim szerint korrelált, például mikrokanonikus, rendszerekre vonatkozó termodinamikai összefüggéseket inkább Rényi-, vagy Tsallis-entrópiák esetén kaphatunk. Ebben az esetben a nulladik főtétele a kulcsa a megfelelő intenzív állapotjelzők, például a hőmérséklet azonosításának [16].

7. *Közvetlen helyettesítés multiplikatörök helyett.* A multiplikatörös módszer azért jó, mert a Liu-egyenletek egy része azonnal azonosítja a Lagrange-Farkas multiplikatöröket az intenzív mennyiségekkel.

Az úgy nevezett Coleman–Noll-eljárás közvetlen behelyettesítés után elemzi az entrópiatermelést a Liu-eljáráshoz hasonlóan. A két módszert összehasonlítja és elemzi gyengén nemlokális állapotterekre [17]. A másik, egyszerűbb, klasszikus módszer a teljes divergenciák leválasztása, azonban ez kevésbé egyértelmű. Cahn–Hilliard-egyenlet bemutatásánál az értekezésben ezt használtam, ott ugyanis a Liu-eljárás alkalmazása sokkal bonyolultabb [18]. A szigorúbb eljárások előre rögzítik a függvények lehetséges változóit, ezért egyértelműbb eredményekre vezetnek és feltárnak olyan általánosítási lehetőségeket, amelyek nem látszanak a konstitutív függvények változóit utólag azonosító, heurisztikus módszernél. További példákat tárgyalok [19, 6]-ben.

8. *További kiterjesztések.* Igen, tervezem.

Legalábbis a deformáció magasabbrendű gradienseit, illetve a sebesség magasabb gradienseit tartalmazó kontinuumelméletek vizsgálatát mindenképpen, ugyanis ez egy nyitott, régi problémakör az ilyen elméletekben fellépő instabilitások miatt. A kontinuummechanika szisztematikus, racionális kiterjesztésének programját ezek miatt tekintik sokan kudarcosnak [20].

9. *Relatívvisztikus reológia?* Igen, ez jó ötlet és kivitelezhető programnak látszik, bár a szükséges stabilitási számítások nem látszanak könnyűnek.

2. MEGJEGYZÉSEK A KISEBB MEGJEGYZÉSEKHEZ:

Bírálok legtöbb kisebb megjegyzésével, javítási javaslatával teljesen egyetértek. Az alábbiakban azokhoz fűzök kommentárt, amelyekre érzésem szerint választ várt, illetve amelyekkel nem értek egyet.

9.o. 1.24: Igen, az időbeli differenciálegyenletekre alapozott közönséges termodinamikai tárgyalás ezt értelmezi pontosan. Itt ezt motiválom.

10-11.o.: A stabilitáselmélet matematikai irodalma élesen megkülönbözteti a differenciálegyenlet szerinti deriváltat az egyszerű időderiválttól.

11.o. A környezet entrópiája lineáris, nem konkáv, a stabilitás bizonyításához a teljes entrópia konkávitása elég.

17.o. Itt az anyagi objektivitás elégtelen tárgyalására céloztam véges deformációs rugalmas anyagok esetén. Az objektivitás ebben a speciális értelemben szerepel.

18.o. Itt nincs ellentmondás. A Gibbs reláció fajlagos mennyiségekre $de = Tds + \sigma : d\epsilon$, ahol ideális rugalmas testre a Hook-törvény érvényes, azaz $\sigma = E : \epsilon$, ahol E a negyedrendű rugalmassági tenzor. Tehát a Gibbs reláció átrendezhető: $d(e - E\epsilon^2/2) = Tds$. Azt gondolom, hogy esetleg ezt szokták $E\epsilon^2/2 = \sigma : \epsilon/2$ -nek írni. Az általam felírt formulák nemcsak ideális rugalmas anyagra érvényesek.

19.o. Igen, egyetértek, ez nem jó. Itt megpróbáltam a Ljapunov-függvényt teljes entrópiaként értelmezni, a gázok mintájára. Itt nem jól definiált a homogén kiterjedt test fogalma, a kontinuum tárgyalás az alapvető.

20.o. Az itt megadott formulák valóban csak szigorúan állapotfüggetlen, állandó Lamé-együtthetők, illetve hőtágulási paraméter esetén érvényesek. A Duhamel-Neuman-törvénynél bonyolultabb eset tárgyalása nem volt cél, a példa az általános stabilitási elvet és az időfüggő leírást szemlélteti.

29.o. 6s: Lásd általános megjegyzések.

41.o. 2.32: A kiterjesztéssel megoldhatóvá válnak a Liu-egyenletek, explicit formulákat lehet felírni. Nem tudom van-e köze a részletes egyensúlyhoz, ezt nem vizsgáltam. Mind ez a kérdés, mind a maradék entrópiaáram fizikai szerepének kérdése nyitott.

48.o: Igen, általánosabb A és B esetén nem a Lagrange-mechanikával analóg a rendszer, hanem annak általánosítását kapjuk. Ennek néhány következményének publikálása folyamatban, [6].

49.o: Nem minden disszipáció származtatható disszipációs potenciálból.

52.o: Az itt tárgyalt klasszikus irreverzibilis termodinamika esetén nem tudok példákat. A közreolológiában, egy másodrendű szimmetrikus tenzor belső változóval, megkerülhetetlen kísérleti tény, hogy szimmetrikus és antiszimmetrikus rész is létezik, [21] és a benne idézett irodalom.

53-54.o: Lásd általános megjegyzések.

54.o, 2.75: A folyadékmechanikában elterjedtebb a nyomástenzor használata, a rugalmasságtanban a feszültségtenzoré. A dolgozatban én többször használok folyadékmodelleket.

59.o. 2.97 felett: A (2.97) formula pont azt mondja, hogy egy tenzordivergencia egy skalárgradienssel arányos, tehát egyszerre térfogati és felületi erőssűrűségről van szó. Ez csak a reverzibilis részre igaz.

83.o. 2.190: Itt szerintem félrevezető mind a magyar, mind az angol terminológia, mert H nem a deformáció gradiense, ezt próbáltuk kicsit javítani Asszonyi Csabával.

92.o: Igen, jogos. Eckart egyáltalán nem foglalkozott a hőmérséklet transzformáció kérdésével és az általa használt (3.7) sűrűségekre vonatkozó Gibbs-reláció többféleképpen is vonatkoztatható termodinamikai testekre. Ez a [16] cikkben leírt gondolatmenetből látszik rendesen, az energiamérleg felintegrálása után ha az együttmozgó impulzus, $G^a = 0$, akkor a folyadék mozgása által meghatározott szinkronizációval (ha van ilyen) az Einstein-Planck-hőmérsékletfogalmat kapjuk. 1940-ben, amikor Eckart a folyadékelméletét publikálta, még csak ez a fogalom létezett.

99.o. 3.35 felett: Igen, de a részecskék individuális négyessebessége itt és a továbbiakban sem fontos, és a később bevezetett áramlási sebességtől még meg is kellene különböztetni.

107.o: Ez a legáltalánosabb feltevés. Az entrópiaderivált szorzóvektora nem feltétlen párhuzamos az egyenlet baloldalával.


111.o: Lásd általános megjegyzések.

129.o: Igen, Liu tétele az affin Farkas-lemma speciális esete, a két formula ugyanúgy néz ki.

131.o: Szerintem ez rendben van így.

136.o: Igen, de ez megtévesztő lehet. Tömegpont esetén egyértelmű a nyugalom, de termodinamikai test esetén nem. A hőmérséklet négyesvektor nem feltétlen párhuzamos az energia vagy a tömeg négyesvektorral.

Budapest, 2019. október 10.



Ván Péter

HIVATKOZÁSOK

- [1] P. Ván and T.S. Biró. First order and generic stable relativistic dissipative hydrodynamics. *Physics Letters B*, 709(1-2):106–110, 2012. arXiv:1109.0985[nucl-th].
- [2] P. Ván. Galilean relativistic fluid mechanics. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 29(2):585–610, 2017. arXiv:1508.00121 v1- Hungarian; v2- English.
- [3] C. Truesdell and W. Noll. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1965. Handbuch der Physik, III/3.
- [4] P. Haupt. *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 2nd edition, 2000.
- [5] M. E. Gurtin, E. Fried, and L. Anand. *The mechanics and thermodynamics of continua*. Cambridge University Press, 2010.
- [6] P. Ván and R. Kovács. Variational principles and nonequilibrium thermodynamics. 2019. arXiv:1908.02679.
- [7] T. Fülöp and S. D. Katz. A frame and gauge free formulation of quantum mechanics. quant-ph/9806067, 1998.
- [8] L. Jánossy. The hydrodynamical model of wave mechanics, (The many body problem). *Acta Physica Hungarica*, 27:35–46, 1969.
- [9] T. Takabayasi. Relativistic hydrodynamics of the Dirac matter Part I. General theory. *Supplement of the Progress of Theoretical Physics*, (4):1–80, 1957.
- [10] B. Bistrovic, R. Jackiw, H. Li, V. P. Nair, and S.-Y. Pi. Non-Abelian fluid dynamics in Lagrangian formulation. *Physical Review D*, 67(2):025013(11), 2003. (hep-th/0210143).
- [11] R. Jackiw, V. P. Nair, S.-Y. Pi, and A. P. Polychronakos. Perfect fluid theory and its extensions. *Journal of Physics A*, 37:R327–R432, 2004. arXiv:hep-ph/0407101.
- [12] T.S. Biró and P. Ván. Splitting the source term for the einstein equation to classical and quantum parts. *Foundations of Physics*, 45:1465–1482, 2015. arXiv:1312.1316.
- [13] Verhás J. *Termodinamika és reológia*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1985.
- [14] J. Verhás. *Thermodynamics and Rheology*. Akadémiai Kiadó and Kluwer Academic Publisher, Budapest, 1997.
- [15] M. Mariano, P. Trends and challenges in the mechanics of complex materials: a view. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 374(2066):20150341, 2016.
- [16] T. S. Biró and P. Ván. About the temperature of moving bodies. *EPL*, 89:30001, 2010. arXiv:0905.1650v1.
- [17] V. Triani, C. Papenfuss, V. A. Cimmelli, and W. Muschik. Exploitation of the Second Law: Coleman-Noll and Liu procedure in comparison. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 33:47–60, 2008.
- [18] P. Ván. Weakly nonlocal non-equilibrium thermodynamics: the Cahn-Hilliard equation. In *Generalized Models and Non-classical Approaches in Complex Materials 1*, pages 745–760. Springer, 2018. arXiv:1710.04204.
- [19] P. Ván. Entropy production in phase field theories. 2019. arXiv:1903.09835.
- [20] I. Müller and W. Weiss. Thermodynamics of irreversible processes - past and present. *Eur. Phys. J. H*, 37:139–236, 2012.
- [21] Cs. Asszonyi, T. Fülöp, and P. Ván. Distinguished rheological models for solids in the framework of a thermodynamical internal variable theory. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 27:971–986, 2015. arXiv:1407.0882.